クラスター崩壊の統計模型

太田雅久、和田隆宏、阿部恭久*
甲南大学、京大基礎物理学研究所*

1．はじめに

最近、原子核物理の立場から励起したマイクロクラスターの原子蒸発に関する理論的な解析の試み [1, 2] が行われ始めた。Bertsch はクラスター表面からの巨視的な原子蒸発と高励起原子核の核子蒸発に用いられる統計模型（Weisskopf 模型）[3] の類似性を議論し、Froblich は Weisskopf 模型を用いてマイクロクラスターの分裂の臨界サイズを調べている。マイクロクラスターの分裂（荷電クラスターまたは荷電原子の放出）及び蒸発（中性クラスターまたは中性原子の放出）を一括して解析する枠組みとして、原子核で用いられてきた統計模型は有用なように思える。

しかし、マイクロクラスターでは放出される原子またはクラスターの分離エネルギーはほとんどの場合未知であることが原子核の場合と異なる。また、励起したマイクロクラスターの状態密度に関する情報も原子核の場合ほど明かではない。さらに、実験的に測定されるマイクロクラスター（主に、冷えきったマイクロクラスターで原子核の蒸発残留核に相当するもの）の初期状態も明かではない。実験量に関しても、原子核で統計模型の解析の対象となるのは、放出粒子のエネルギースペクトル（従って、平均運動エネルギー）、角度分布、蒸発残留核の質量分布等、模型パラメータを決定できる独立な量がいろいろと存在する。これに対して、マイクロクラスターでは放出原子の平均運動エネルギーや分裂の始まるクラスターサイズのしきい値ぐらいしか利用できない。また、現段階では原子核の融合反応に対応するような実験は望めない。マイクロクラスターの原子蒸発については原子核の場合に比べて圧倒的な情報不足の中で行わなければならないのが現状のようである。

この状況を踏まえて、従来マイクロクラスターの分野で使われてきた統計的処方であるＲＲＫ理論、ＲＲＫM理論（または、Transition State の方法）[4] 及び原子核の分野で使われてきた Weisskopf 模型（Phase Space Approach）や Bohr-Wheeler[5] 公式について、マイクロクラスターに適用した場合の形式上の違いと、少しばかり具体的な計算を示し、今後の解析の手始めとしたい。

2．統計模型

マイクロクラスターの場合、励起エネルギーは原子の様々な振動モードに分配されると考えられる。n 個の原子から構成されるマイクロクラスターの内部励起にかかわる独立な振動モードの数は $3n-6$ なので、励起エネルギーを $3n-6$ 個の独立な調和振動子に分配するとすれば、その系の分配関数は状態密度関数$\Omega(E)$ を用いて、

$$Z(\beta)=\int e^{-\beta E}\Omega(E)d\Omega.$$

逆変換して、

$$\Omega(E)=\frac{1}{\hbar^{3n-6}}\left(\Pi_{i=1}^{3n-6}\omega_i\right)^{-1}\frac{E^{3n-7}}{(3n-7)!}. \quad (1)$$

これはKasselの式と呼ばれているものである。もし、デバイ模型を採用すると、振動数分布を近似的に決めて、[4]

$$\Omega(E)=\frac{1}{(\hbar\omega_D)^{3n-6}}\Pi_{i=1}^{3n-6}\left(\frac{i-1/2}{3n-6}\right)^{-1/3}\frac{E^{3n-7}}{(3n-7)!}. \quad (2)$$

しかし、通常、もっと簡単に平均的な振動数を用いて次の式がよく使われる。

$$\Omega(E)=\frac{1}{(\hbar\omega)^{3n-6}}\frac{E^{3n-7}}{(3n-7)!} \quad (3)$$

以下、状態密度に関しては上式を仮定してＲＲＫ、ＲＲＫＭ理論及びWeisskopf模型について形式的な違いをみてみる。

ＲＲＫ理論は「特定の振動子に E_0より大きいエネルギーを与えて、残りの全ての振動子に全エネルギーを分配する方法の数を、全ての振動子に全エネルギーを分配する方法の数で割った量が反応率に比例する」という考えに立っている。従って、n 個のクラスターから原子一個を放出する反応率は

$$k(E)=A\left(\frac{E-E_0}{E}\right)^{3n-7} \quad (4)$$

次に、ＲＲＫＭ理論は「反応物と生成物を区切るポテンシャル面が存在して、反応座標系での軌道は一度だけその様な鞍点を通過する」というTransition Stateの考え方を持ち込む。さらに、特定のエネルギーでの全ての状態は平等に占有でき、状態間のエネルギーの再配分は反応座標系での運動に比べて充分早いという仮定が入る。この考えのもとで反応率は次のように表される。

$$k(E)=\frac{N(E-E_B)}{h\rho_{g.s.}(E)} \quad (5)$$

ここで$\rho_{g.s.}$は基底形状でのマイクロクラスターの振動状態の密度関数で、$N(E-E_B)$ はTransition Stateでの振動状態の数である。E_Bは基底状態を基準にしたTransition Stateのポテンシャル障壁の高さである。

原子核の場合、この理論の考え方は核分裂の崩壊幅を計算するのに用いられる（Bohr-Wheeler 公式）。この処方を無理に核子放出に適用すると、Transition State は残る原子核と放出される核子が接触した状態と考えられるので Transition State での振動状態数は $3(n-1)-6$ の振動子に $E-E_0-\epsilon$ のエネルギーを分配する組み合わせの数である。ここで、ϵは放出原子の運動エネルギーである。

$$k(E) = \frac{1}{2\pi\hbar\rho_{g.s.}(E)}\int_0^{E-E_0}\rho_{t.s.}(E-E_0-\epsilon)d\epsilon \tag{6}$$

$$= \frac{(\hbar\omega)^3(3n-7)(3n-8)}{2\pi}\frac{(E-E_0)^{3n-9}}{E^{3n-7}} \tag{7}$$

励起した原子核からの核子放出の解析に用いられる Weisskopf Model をそのまま適用すると、

$$k(E) = \frac{\mu}{\pi^2\hbar^3\rho_{g.s.}(E)}\int_0^{E-E_0}\epsilon\sigma(\epsilon)\rho_{g.s.}(E-E_0-\epsilon)d\epsilon \tag{8}$$

$$= \frac{\mu R^2}{\pi\hbar^3}(\hbar\omega)^3(3n-7)\frac{(E-E_0)^{3n-8}}{E^{3n-7}} \tag{9}$$

以上、ＲＲＫ理論、ＲＲＫＭ理論、及び Weisskopf Model は、定数因子は別としてそれぞれ $(E-E_0)^{3n-7}$, $(E-E_0)^{3n-9}$, $(E-E_0)^{3n-8}$ の異なるエネルギー依存性を示していることがわかる。

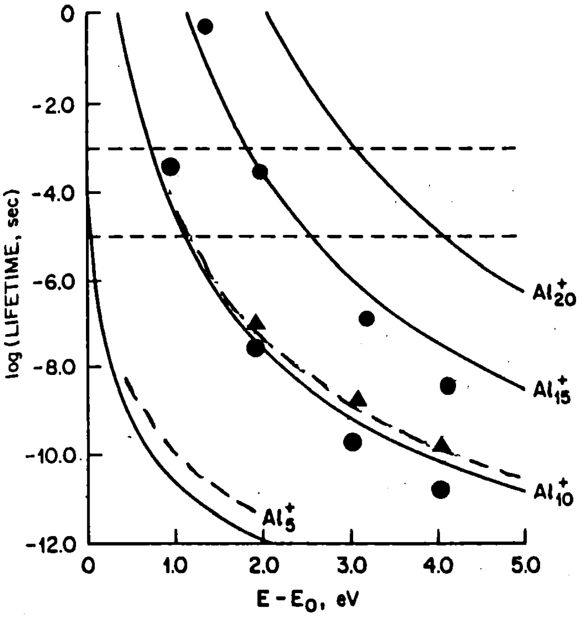
３．Ar クラスターでの計算例と考察

Ray 達 [6] によって行われた Al_n^+クラスターの光分解の実験データに上記の理論を適用してみる。Ray 達はこの実験によって Al_n^+からの中性原子の分解エネルギーをＲＲＫＭ理論によって導き出している。図に示すように、色々なサイズの Alクラスターの中性原子放出に対する寿命が励起エネルギーと分解エネルギーの差、$E-E_0$、の関数として表されている。実線は Ray 達の計算によるＲＲＫＭ理論（式（５））によるものである。ＲＲＫＭ理論の考え方を原子核流の Transition State の方法で計算した（７）式の結果は破線である。また、Weisskopf 模型（式（９））を用いると、丸印の結果を与える。平均寿命は $k^{-1}(E)$ に関係するので $(E-E_0)^{3n-9}$, $(E-E_0)^{3n-8}$ の性質がよく現れている。

次に、同じ Transition State の考え方で、もう少し動力学的に解析を行ってみた。つまり、放出しようとする原子に非常に強い摩擦力が働いている仮定のもとで、原子核の分裂動力学を調べる際に用いられる Smoluchovski 方程式に従って、レナード・ジョーンズ型ポテンシャルを拡散により脱出してゆく原子の割合を計算してみた。

$$\frac{\partial}{\partial t}f = \frac{\partial}{\partial q}\left(\frac{1}{m\beta}\frac{\partial V}{\partial q}f\right) + \frac{kT}{m\beta}\frac{\partial^2}{\partial q^2}f \tag{10}$$

ここで、fは確率分布関数、qは反応座標、βは摩擦係数、Tはクラスターの温度、Vはレナード・ショーンズ型ポテンシャルである。この結果は三角印で示されている。ＲＲＫＭ理論とよく似た結果を示している。



どの統計模型でも原子蒸発の割合に関してよく似た結果を与えるが、状態密度の公式を同じにしても、励起エネルギー依存性が微妙に異なることに注意する必要がある。

参考文献

[1] P.Fröbrich, HMI-preprint TV95-Fröb2.

[2] G.F.Bertsch, N.Oberhofer and S.Stringari, Z.Phys. D20 (1991) 123.

[3] V.Weisskopf, Phys. Rev. 52 (1937) 295.

[4] M.F.Jarrold, *Clusters of Atomes and Molecules*, Springer Series in Chemical Physics 52 (Springer 1994).

[5] N.Bohr and J.A.Wheeler, Phys. Rev. 56 (1939) 426.

[6] U.Ray et al., J.Chem. Phys. 91 (1989) 2912.